

Programação Diferenciável (Aprendizado Profundo - UFMG)

Preâmbulo

O código abaixo consiste dos imports comuns. Além do mais, configuramos as imagens para ficar de um tamanho aceitável e criamos algumas funções auxiliares. No geral, você pode ignorar a próxima célula.

```
1 # -*- coding: utf8
 3 import matplotlib.pyplot as plt
 1 plt.rcParams['figure.figsize'] = (8, 5)
3 plt.rcParams['axes.axisbelow'] = True
4 plt.rcParams['axes.labelsize'] = 16
 5 plt.rcParams['axes.linewidth'] = 1
 6 plt.rcParams['axes.spines.bottom'] = True
7 plt.rcParams['axes.spines.left'] = True
8 plt.rcParams['axes.titlesize'] = 16
9 plt.rcParams['axes.ymargin'] = 0.1
10
11 plt.rcParams['font.family'] = 'serif'
12
13 plt.rcParams['axes.grid'] = True
14 plt.rcParams['grid.color'] = 'lightgrey'
15 plt.rcParams['grid.linewidth'] = .1
16
17 plt.rcParams['xtick.labelsize'] = 16
18 plt.rcParams['xtick.bottom'] = True
19 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'out'
20 plt.rcParams['xtick.major.size'] = 10
21 plt.rcParams['xtick.major.width'] = 1
22 plt.rcParams['xtick.minor.size'] = 3
23 plt.rcParams['xtick.minor.width'] = .5
24 plt.rcParams['xtick.minor.visible'] = True
26 plt.rcParams['ytick.labelsize'] = 16
27 plt.rcParams['ytick.left'] = True
28 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'out'
29 plt.rcParams['ytick.major.size'] = 10
30 plt.rcParams['ytick.major.width'] = 1
31 plt.rcParams['ytick.minor.size'] = 3
32 plt.rcParams['ytick.minor.width'] = .5
33 plt.rcParams['ytick.minor.visible'] = True
35 plt.rcParams['legend.fontsize'] = 16
36
37 plt.rcParams['lines.linewidth'] = 4
38 plt.rcParams['lines.markersize'] = 10
1 plt.style.use('tableau-colorblind10') # use um estilo colorblind!
 2 plt.ion()
    <contextlib.ExitStack at 0x7dc409922710>
```

✓ 1. Tensores em Numpy

O primeiro passo para usar numpy é importar a biblioteca.

```
1 import numpy as np
```

Quando pensamos no lado prático do aprendizado profundo, um aspecto chave que ajuda na implementação de novos algoritmos é a chamada programação diferenciável. Na próxima aula vamos voltar na mesma. No momento, o importante é salientar que a programação diferenciável faz uso extensivo de Tensores.

Um <u>Tensor</u> é uma generalização de matrizes para mais dimensões. Quando falamos de tensores, temos três casos especiais e um genérico que engloba os outros três:

1. Escalar: Um tensor de zero dimensões.

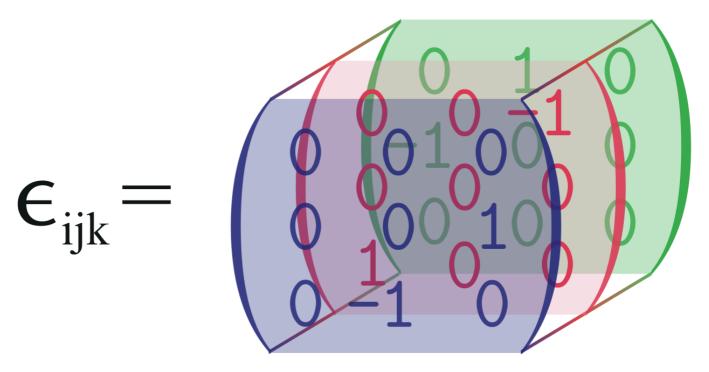
1 1

1

2. Vetor: Um tensor de uma dimensão.

3. Matrizes: Um tensor de duas dimensões.

4. **Tensores**. Caso geral, representam n-dimensões. Na figura temos um tensor 3x3x3.



No exemplo abaixo, temos um tensor de dimensão $3 \times 2 \times 2$.

```
1 X = np.random.randn(3, 2, 2) # Gera números aleatórios de uma normal N(0, 1) 2 X
```

Note que ao selecionar elementos da primeira dimensão ficamos com matrizes 2×2 .

✓ 1.1) Indexando

Sendo X uma matriz:

```
1 X = np.array([[1, 2], [3, 4]])
2 X
array([[1, 2],
[3, 4]])
```

Podemos selecionar uma linha com a sintaxe X[i], sendo i um inteiro.

```
1 X[0] # pegando a primeira linha de X
array([1, 2])
```

Podemos selecionar uma coluna com a sintaxe X[:, j], sendo j um inteiro.

```
1 X[:, 1] # pegando a segunda coluna de X
array([2, 4])
```

Podemos selecionar mais de uma linha ou coluna utilizando a sintaxe X[um_vetor] ou X[:, um_vetor], respectivamente.

Podemos selecionar linhas e colunas também indexando o tensor através de um vetor booleano.

A sintaxe X[vetor_booleano] retorna as linhas (ou colunas quando X[:, vetor_booleano]) onde o vetor é True.

✓ 1.2) Shape, Reshape e Ravel

Todo vetor, matriz e tensor pode ser redimensionado.

Observe como no tensor abaixo temos 3x2x2=12 elementos. Podemos redimensionar os mesmos para outros tensores com 12 elementos.

```
1 X = np.random.rand(3, 2, 2)
2 print(X.shape, X)

(3, 2, 2) [[[0.2827676   0.31646794]
       [0.15744129   0.60941124]]

[[0.53342257   0.81578043]
       [0.14073367   0.88056941]]

[[0.91197042   0.76521806]
       [0.56813487   0.71445641]]]
```

Podemos redimensionar os elementos como uma matriz 2×6 :

```
1 X_matrix = X.reshape((2, 6))
2 print(X_matrix.shape, X_matrix)

(2, 6) [[0.2827676  0.31646794  0.15744129  0.60941124  0.53342257  0.81578043]
      [0.14073367  0.88056941  0.91197042  0.76521806  0.56813487  0.71445641]]
```

Em Numpy (e PyTorch), podemos fazer com que a biblioteca infira uma dimensão utilizando -1:

Podemos redimensionar os elementos para um outro tensor:

E, por fim, podemos redimensionar os elementos como um vetor, realizando uma operação de flattening:

Observação: Podemos redimensionar os elementos como um vetor de 3 formas principais:

- 1. Através da função flatten, como visto acima;
- 2. Através da função ravel (presente tanto em Numpy quanto em PyTorch);
- 3. Através de um . reshape, passando como parâmetro o número dos elementos (ou -1).

Os 3 métodos possuem algumas sutilezas que diferenciam um dos outros. Para mais informações consulte o seguinte link.

2. Tensores em PyTorch

PyTorch é o arcabouço que vamos usar para as nossas tarefas. Assim como o NumPy, o Pytorch é uma biblioteca de processamento vetorial/matricial/tensorial. Operações sobre os tensores do Pytorch possuem sintaxe consideravelmente parecida com operações sobre tensores do NumPy.

O mesmo faz uso de tensores bem similares ao NumPy. Porém, com PyTorch conseguimos fazer uso da GPU.

```
1 import torch
```

2.1) Casting para o dispositivo correto

Como usaremos processamento vetorial principalmente em GPUs para aprendizado profundo, primeiramente é possível verificar se há uma GPU disponível com o trecho de código abaixo, armazenando os tensores nos dispositivos apropriados.

```
1 if torch.cuda.is_available():
2    device = torch.device('cuda')
3 else:
4    device = torch.device('cpu')
5
6 print(device)
    cpu
```

Podemos também realizar essa verificação em uma linha de código (+ pytônico)

2.2.) Tensores no Pytorch

Para criar tensores novos, podemos utilizar a função torch.tensor, similar à função numpy.array da biblioteca Numpy:

```
1 tns = torch.tensor([1, 2, 3, 4, 5, 6])
2 print(tns)
tensor([1, 2, 3, 4, 5, 6])
```

Podemos redimensionar os tensores de maneira similar ao que vimos em Numpy através da função view:

Assim como mencionado em Numpy, podemos utilizar -1 para fazer com que a biblioteca faça uma inferência no formato necessário de acordo com os elementos restantes:

Observação: Em PyTorch, além de possuirmos a função view, também possuímos a função reshape. Ambas possuem algumas diferenças sutis. Caso queira obter mais informações sobre tais diferenças, acesse o seguinte <u>link</u>. Porém, no geral, iremos trabalhar mais com a função view ao desenvolver códigos utilizando PyTorch.

Podemos criar tensores previamente preenchidos por elementos, como Os através da função torch.zeros e 1s através da função torch.ones:

Similar à funções do Numpy, podemos iniciar tensores com valores aleatórios:

Similar à Numpy, podemos realizar operações de soma, multiplicação, entre outras, com tensores:

Similar à Numpy, podemos indexar os tensores da mesma forma apresentada anteriormente:

```
1 print(tns_sum[1, 1]) # Indexando um elemento
2 print(tns_sum[0, :]) # Indexando uma linha (pode também ser tns_sum[0])
3 print(tns_sum[:, 1]) # Indexando uma coluna

  tensor(0.8306)
  tensor([-0.3231, 0.4878, 2.3799])
  tensor([0.4878, 0.8306])
```

Podemos utilizar a função torch.from_numpy para converter um tensor de Numpy para PyTorch; ou a função .numpy() para converter um tensor de PyTorch para Numpy:

Por fim, podemos concatenar dois, ou mais, tensores com a função torch.cat:

• O parâmetro dim em PyTorch é análogo ao parâmetro axis do Numpy. Nele, iremos informar sobre qual dimensão queremos que uma certa operação seja feita. No caso abaixo, ao informarmos a primeira dimensão (0), estamos dizendo para o PyTorch efetuar uma concatenação dos dois tensores a partir da sua primeira dimensão, ou seja, "colando" os tensores verticalmente (no sentido das linhas).

Várias outras operações sobre tensores do Pytorch podem ser vistas nos seguintes tutoriais:

- 1. https://jhui.github.io/2018/02/09/PyTorch-Basic-operations/
- 2. https://pytorch.org/tutorials/beginner/pytorch_with_examples.html

Conjunto de Problemas 1: Vetorização

Antes de continuar, vamos importar algumas funções que serão utilizadas para testar o resultado dos seus algoritmos.

Estas, vão vir do módulo testing do numpy.

```
1 from numpy.testing import assert_equal
2 from numpy.testing import assert_almost_equal
3 from numpy.testing import assert_array_almost_equal
```

Seu objetivo é medir a velocidade das operações de álgebra linear para diferentes níveis de vetorização.

1. Construa duas matrizes A e B com entradas aleatórias Gaussianas de tamanho 128×256 .

Dica: Use o módulo time para mensurar o tempo da operação.

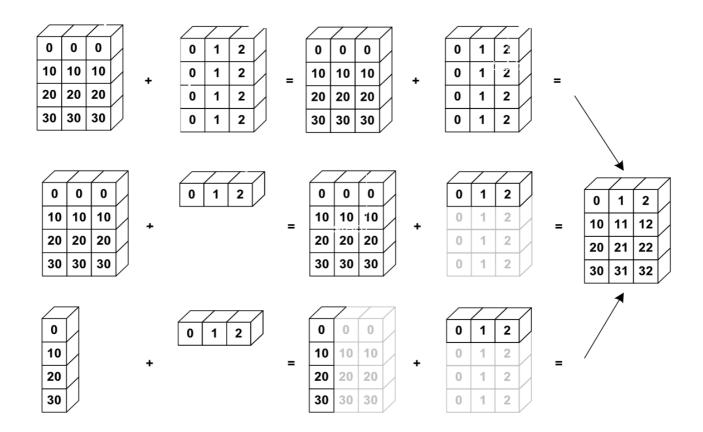
```
1 A = torch.randn(128,256)
2 B = torch.randn(128,256)
```

```
1 # testes, não apague as linhas!!
2 assert_equal((128, 256), A.shape)
3 assert_equal((128, 256), B.shape)
4
5 # A chamada .numpy() converte os vetores em vetores numpy. Útil para testes!
6 Anp = A.numpy()
7 Bnp = A.numpy()
8
9 # testando média e desvio padrão
10 assert_almost_equal(Anp.mean(), 0, decimal=2)
11 assert_almost_equal(Anp.std(ddof=1), 1, decimal=2)
12
13 assert_almost_equal(Bnp.mean(), 0, decimal=2)
14 assert_almost_equal(Bnp.std(ddof=1), 1, decimal=2)
```

2. Calcule $C=AB^T$, tratando A como uma matriz, mas computando o resultado para cada coluna de B. Em outras palavras, realize um produto matricial utilizando um laço for ! Pare realizar este código, é importante entender o conceito de broadcasting.

Em código numpy e torch, a operação de broadcasting replica linhas e colunas de tensores para realizar operações. Para entender melhor, leia o <u>documento</u>. A figura abaixo exemplifica broadcasting. No geral, as dimensões de arrays casam, as operações são realizadas (primeira linha da figura). Mesmo quando as dimensões não casem, se a última dimensão for compatível é feito a replicação (broadcasting), ver a segunda linha da figura. Por fim, mesmo quando as dimensões não casam mas uma delas é 1 (4x1 + 1x3 na linha 3), é feito broadcasting.

Y



Dica: Você deverá fazer o código em uma linha apenas. Para isso, você vai focar no caso da linha 2 da figura. Multiplique uma linha de A por B. Depois disso, use .sum(axis=...) para realizar a soma na dimensão correta.

```
1 import time
3 start_time = time.time()
4 C = np.zeros((128, 128))
5 for linha in range(A.shape[0]):
      C[linha] = (A[linha]*B).sum(axis = 1)
8 print('Tempo de execução: ', time.time() - start_time)
10
    Tempo de execução: 0.011831283569335938
1 # testes, não apague as linhas!!
2 Cteste = np.matmul(A, B.T) # faz a leitura, realiza operação
3 assert_array_almost_equal(Cteste, C, decimal=3)
  3. Calcule C=AB^t usando operações matriciais. Ou seja, sem usar nenhum laço. Ao mensurar o tempo, ficou mais
    rápido?
1 start_time = time.time()
2 C = torch.mm(A, B.t())
3 print('Tempo de execução: ', time.time() - start_time)
```

Essa implementação é mais rápida.

Tempo de execução: 0.02090620994567871

```
1 # testes, não apague as linhas!!
2 Cteste = np.matmul(A, B.T)  # faz a leitura, realiza operação
3 assert_array_almost_equal(Cteste, C, decimal=3)
```

- Observando o tempo gasto nas duas formas de calcular $C=AB^T$, podemos perceber que ao utilizarmos funções nativas da biblioteca (como np.matmul e torch.mm), temos uma redução significativa do tempo se compararmos à utilização de um laço for.
- Conjunto de Problemas 2: Computação eficiente de memória

Crie duas matrizes aleatórias de tamanho 4096×4096 . Chame as mesmas de A e B novamente.

```
1 A = torch.rand(4096, 4096)
2 B = torch.rand(4096, 4096)
```

5. Crie uma função que recebe as matrizes A, B e C, e um número de iterações para atualizar C, de forma que $C = AB^T + C$. Essa função deve, primeiro, calcular a multiplicação de matrizes entre A e B e depois adicionar o valor à C, de acordo com o número de iterações. A mesma deve atualizar C sem alocar memória nova para essa variável.

```
1 def update_c(C, A, B, n_iter=2):
2     D = torch.mm(A, B.t())
3     for _ in range (n_iter):
4     C[:] = D + C
```

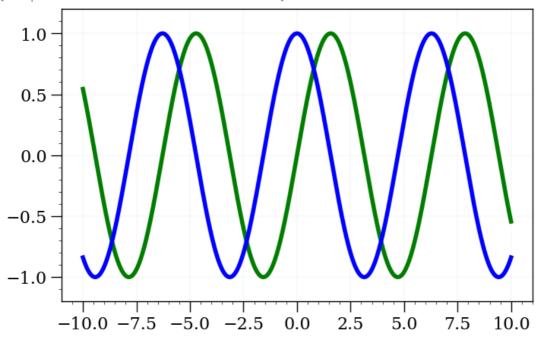
```
1 # testes não apague!
2 Ct = torch.zeros(A.shape)
3 Cteste = (Ct + np.matmul(A, B.T))
4 Cteste = (Cteste + np.matmul(A, B.T))
5
6 C = torch.zeros(A.shape)
7 update_c(C, A, B, 2)
8 assert_array_almost_equal(Cteste, C.numpy(), decimal=3)
```

Conjunto de Problemas 3: Programação Diferenciável

Agora vamos aprender um dos pontos chaves de fazer uso de bibliotecas como pytorch/tensorflow/etc, a programação diferenciável. Diferente do exercício que vocês fizeram na mão, usando a biblioteca conseguimos derivar de forma automágica. Portanto, observe como o código abaixo deriva a função seno.

```
1 x = np.linspace(-10, 10, 1000)
2 x_torch = torch.tensor(x, requires_grad=True)
3
4 y = torch.sin(x_torch)  # seno original
5
6 # Devido ao fato de que o y final não é um escalar precisamos passar o vetor v tal que v é a jacobiana
7 # pela qual vamos multiplicar as jacobianas da variavel node (neste caso, x) conforme descrito em
8 # https://pytorch.org/tutorials/beginner/blitz/autograd_tutorial.html
9 # veremos mais sobre o processo de backprogation, jacobiano, etc no futuro
10 v = torch.ones(x_torch.shape, dtype=torch.double)
11
12 # Como aqui x da origem a y diretamente, nosso v sera apenas um vetor de 1's com a mesma dimensao de x
13 y.backward(v)
14
15 plt.plot(x_torch.detach().numpy(), y.detach().numpy(), 'g', label='sin(x)')
16 plt.plot(x_torch.detach().numpy(), x_torch.grad.numpy(), 'b', label='sin\'(x)')
```

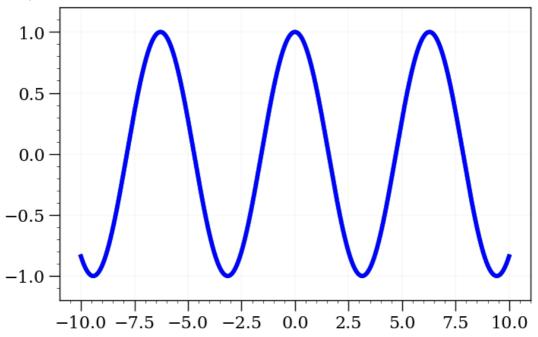




O resultado é a mesma curva da função cosseno! Para entender melhor o autograd, leia a seção respectiva do pyTorch Blitz.

```
 1 \; plt.plot(x\_torch.detach().numpy(), \; x\_torch.grad.numpy(), \; 'g', \; label='sin\'(x)') \\ 2 \; plt.plot(x\_torch.detach().numpy(), \; torch.cos(x\_torch).detach().numpy(), \; 'b', \; label='cos(x)')
```

[<matplotlib.lines.Line2D at 0x7dc33e981450>]



6. Derive a função logística usando pytorch.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

```
1 x = np.linspace(-10, 10, 1000) # Não mude o valor de x!
2 x_torch = torch.from_numpy(x)

1 x_torch = torch.tensor(x, requires_grad=True)
2 y = 1.0 / (1.0 + torch.exp(-x_torch))
3 v = torch.ones(x_torch.shape, dtype=torch.double)
4 y.backward(v)

1 # testes, não apagar
2 y_test = 1.0/(1 + np.exp(-x))
3 derivada_teste = y_test * (1 - y_test)
4 assert_array_almost_equal(derivada_teste, x_torch.grad.numpy(), decimal=3)
```

A operação detach permite quebrar a computação em várias partes. Em particular, isto é útil para aplicar a regra da cadeia. Suponha que u=f(x) e z=g(u), pela regra da cadeia, temos $\frac{dz}{dx}=\frac{dz}{du}\frac{du}{dx}$. Para calcular $\frac{dz}{du}$, podemos primeiro separar u da computação e, em seguida, chamar z. backward () para calcular o primeiro termo.

Observe no caso abaixo como derivamos $u=x^2$. A resposta deve ser 2x para cada termo [0, 1, 2, 3].

```
1 x = torch.arange(4, dtype =torch.float)
2 x.requires_grad_(True)
3
4 u = x * x
5 jacobX = torch.ones(x.shape)
6 u.backward(jacobX)
7 x.grad
tensor([0., 2., 4., 6.])
```

Agora vamos fazer $z=u^3$ e computar as derivadas intermediarias.

```
1 x = torch.arange(4, dtype = torch.float)
2 x.requires_grad_(True)
4 u = x * x
5 v = u.detach() # u ainda mantém o grafo computacional
6 v.requires_grad_(True)
7z = v * v * v
9 print(z)
10
11 jacobX = torch.ones(x.shape)
12 u.backward(jacobX)
13 x.grad
    tensor([ 0., 1., 64., 729.], grad_fn=<MulBackward0>)
    tensor([0., 2., 4., 6.])
Acima temos a derivada de x^2. Abaixo temos a derivada de g(x^2).
1 jacobV = torch.ones(v.shape)
2 z.backward(jacobV)
3 v.grad
    tensor([ 0., 3., 48., 243.])
  7. Agora, sendo f(x) = 1 + x^2 e g(x) = 1 + 7f(x)^4. Vamos aplicar a regra da cadeia em pytorch
1 x = torch.arange(4, dtype = torch.float)
 2 x
    tensor([0., 1., 2., 3.])
1 x.requires_grad_(True)
2 u = 1 + x*x
 3 jacobX = torch.ones(x.shape)
4 u.backward(jacobX)
1 # Testando a sua solução
 2 # Aqui pode ser meio confuso, mas o gradiente referente à derivada de
3 # f(x) com relação a x, por exemplo, fica armazenada no tensor x, mais especificamente em x.grad
4 assert_array_almost_equal([0, 2, 4, 6], x.grad.numpy())
1 \vee = 1 + \times * \times
 2 u = v.detach()
 3 u.requires_grad_(True)
5z = 1 + 7 * torch.pow(u, 4)
7 jacobX = torch.ones(x.shape)
8 v.backward(jacobX)
10 jacobU = torch.ones(u.shape)
11 z.backward(jacobU)
12
13
1 # Testando a sua solução (caso seja necessário, modifique o nome da sua variável auxiliar para 'u')
2 # Note que agora o gradiente referente à derivada está presente na variável 'u', e não mais em 'x'
3 assert_array_almost_equal([28, 224, 3500, 28000], u.grad.numpy())
```

Conjunto de Problemas 4: Mais Derivadas

Vamos brincar um pouco de derivadas dentro de funções. Dado dois números x e y, implemente a função \log_{exp} , que retorna:

$$f(x,y) = -\logigg(rac{e^x}{e^x + e^y}igg)$$

```
1 def log_exp(x, y):
2    numerador = torch.pow(torch.e, x)
3    denominador = torch.pow(torch.e, x) + torch.pow(torch.e, y)
4    return -torch.log(numerador/denominador)
```

1. Abaixo vamos testar o seu código com algumas entradas simples.

```
1 x, y = torch.tensor([2.0]), torch.tensor([3.0])
2 z = log_exp(x, y)
3 z
    tensor([1.3133])

1 # Teste. Não apague
2 assert_almost_equal(1.31326175, z.numpy())
```

2. A função a seguir computa $\partial z/\partial x$ e $\partial z/\partial y$ usando autograd.

Testando

```
1 x, y = torch.tensor([2.0], dtype = torch.double) ,torch.tensor([3.0], dtype = torch.double)
2 dx, dy = grad(log_exp, x, y)

1 assert_almost_equal(-0.7310586, dx.numpy())
2 assert_almost_equal(0.7310586, dy.numpy())
```

4. Agora teste com números maiores, algum problema?

```
1 x, y = torch.tensor([400.0]).double() ,torch.tensor([800.0]).double()
2 grad(log_exp, x, y)
    (tensor([nan], dtype=torch.float64), tensor([nan], dtype=torch.float64))
```

5. Pense um pouco sobre o motivo do erro acima. Usando as propriedade de logaritmos, é possível fazer uma função mais estável. Abaixo segue a implementação da mesma. O problema aqui é que o exponencial "explode" quando x ou y são muito grandes. Este $\underline{\text{link}}$ pode ajudar.

```
1 x, y = torch.tensor([400.0], dtype = torch.double), torch.tensor([800.0], dtype = torch.double)
2 def stable_log_exp(x, y):
3     return torch.log(1 + torch.exp(y-x))
4
5 dx, dy = grad(stable_log_exp, x, y)
```

```
1 stable_log_exp(x, y)
    tensor([400.], dtype=torch.float64, grad_fn=<LogBackward0>)
1 # Teste. Não apague
2 assert_equal(-1, dx.numpy())
3 assert_equal(1, dy.numpy())
```

https://colab.research.google.com/drive/1oSXUN0RWyDZxkWQj--2tZbpAEYNPT4uU#scrollTo=2728a6f2&printMode=true